



TITLE:

中間状態とエネルギー論(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

新上, 和正

CITATION:

新上, 和正. 中間状態とエネルギー論(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告). 物性研究 1987, 48(2): A35-A37

ISSUE DATE:

1987-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92505>

RIGHT:

【要約】結晶状態には、周期、準周期、アモルファス（ランダム）状態の他に、中間状態という新しい状態があることを提案した。しかし、ここでは、中間状態は多粒子間の2体力相互作用のレンジが有限である限り、1次元系（格子気体模型）では現れないことを示す。

序論 前研究会（物性研究所短期研究会「準結晶の構造と物性」）で、2体力で相互作用（図1）する多粒子系の基底状態を1次元格子気体模型で考察し、相互作用レンジ N_R と粒子密度 c の関数として

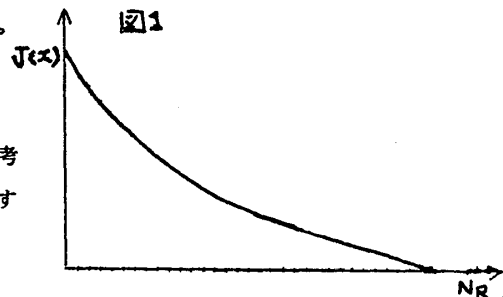
- (1) 周期状態 ($W_N = 1$)
 (2) 準周期状態 ($W_N = 1$)
 (3) アモルファス（ランダム） ($W_N = e^{\alpha N}$)

の3種類が現われる事を述べた。括弧内には状態の縮退数の粒子数 N の依存性をしめす。しかし、この結果は1次元格子気体模型と図1の相互作用を仮定した。そこで、「これら3種の状態は多粒子系の全て安定な配置を尽くしているか？」という疑問に導かれる。これに答えるために、 W_N の N 依存性を調べた。(1),(2) の W は有限で、構造はdecidableである。一方、(3) は N と共に発散し、結果として、構造はundecidableとなる。さらに、(3) の W_N の関数型は系を多くの部分系に分割したときの部分系の統計的独立性を保証する。この2つの考察から、次の性質を持つ新しい（中間状態と呼ぶ）状態に導かれる。

(A) 構造のundecidability。つまり、 W_N は N と共に発散する。

(B) 部分系のstatistical non-independence。つまり、 W_N の発散は指数関数型程には強くない。

性質(A)より、中間状態は非周期的であり、性質(B)より、中間状態は多くの状態があるにも拘らず1粒子当たりのentropy=0である。従って、中間状態は周期、準周期状態とアモルファス状態との中間に位置する。ここで提案された中間状態^{1),2)}とShechtmanite（準結晶）との関係は明らかにされるべき問題であるが、両方は深い関係にあると考えられる。前研究会で、(1)Shechtmaniteの構造模型としてよく引用される2D-Penrose tiling は中間状態である、(2)どんな2体力相互作用でも相互作用レンジが有限である限り、1次元格子気体模型では中間状態は現れないことに触れた。この講演は、(2)の証明を与え、合わせて相互作用レンジ無限大で新たな状態が現われる可能性を推測する。



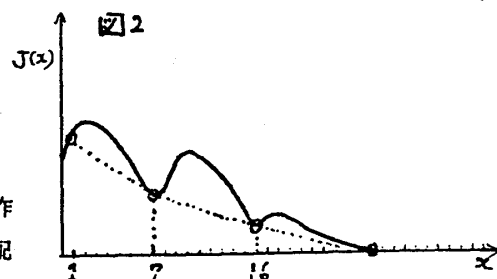
1 構造問題 1次元格子気体模型で基底状態の粒子配置を考える。粒子系は第M番目最近接粒子間まで2体力で相互作用するとする。他の重要なparameterは粒子密度 c で

$$c = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N_0}} N/N_0 \quad (1-1)$$

で定義される。この時、相互作用エネルギー E は

$$E = N \sum_{i=1}^M E_i \quad (1-2)$$

と分解できる。ここで、 E_i は第 i 番目の最近接粒子間相互作用である。始めに $M=1$ と2迄の相互作用を考慮した場合の配



置を導き、一般のMの場合へと進む。

(1-1) $M=1$ のみの場合 このとき、エネルギーは

$$E_1 = \sum_{n=1}^{\infty} p(n) J(n) \quad (1-1-1)$$

$p(n)$ は、固定した粒子から距離 n にある粒子確率であり、

$$\sum_n p(n)=1 \quad \text{と} \quad \sum_n np(n)=1/c \quad (\text{平均粒子間距離}) \quad (1-1-2)$$

を満たす。(1-1-2) の下で(1-1-1) を最小にする $p(n)$ を見いだす手続きは、先ず、与えられた相互作用 (図 2) を下に凸な多角形で置き換える。ここで重要な n の値は $n=1, 7, 16$ のような多角形の頂点である。もし、 $1/7 < 1/c < 1$ なら $p(1)=0=p(7)$ であり他は $p(n)=0$ である。 $p(1)$ と $p(7)$ は(1-1-2) から決まる。この時、粒子配置はの粒子間隔 1 と 7 がランダムに並んだものである。他方、 $c=1/7$ のような場合には $p(7)=1$ で他の $p(n)$ は 0 である。よって、粒子配置は粒子間隔 7 が周期的に並んだものである。従って、 $M=1$ のとき(i) ランダムか(ii)周期的のどちらかである。(i) の entropy 計算は容易である。

(1-2) $M=2$ までの場合 エネルギーは

$$E_1 + E_2 = \sum_n p(n) J(n) + \sum_{n_1, n_2} p(n_1; n_2) J(n_1 + n_2) \quad (1-2-1)$$

となる。 $p(n; n_1)$ は固定した粒子から n 、さらに n_1 離れたところに粒子がある (2 体の) 確率である。

(1-2-1) に課す条件は(1-1-2) の他に

$$\sum_{n_1} p(n_1; n_2) = p(n_2) \quad \text{と} \quad \sum_{n_2} p(n_1; n_2) = p(n_1) \quad (1-2-2)$$

ある。(1-2-2) を用いて(1-2-1) は

$$E_1 + E_2 = \sum_{n_1, n_2} F(n_1; n_2) p(n_1; n_2) \quad (1-2-3)$$

$$F(n_1; n_2) = \frac{1}{2} [J(n_1) + J(n_2)] + J(n_1 + n_2) \quad (1-2-4)$$

と書ける。 $F(n_1; n_2)$ の 2 つの引き数の交換の対称性から $p(n_2; n_1)$ も(1-2-3) の解である。(1-1-2) と(1-2-2) の下でエネルギーを最小にする解を見つける手続きは、 $F(n_1; n_2)$ を、 $M=1$ の場合と同様に下に凸な多角形でおきかえる。その多角形は $F(n_1; n_2)$ と少なくとも 4 点 $(m_1, m_3), (m_3, m_1)$ 又は $(m_2, m_4), (m_4, m_2)$ で接する。しかし、許される配置を具体的に調べてみれば、 $m_1 = m_2$ が成立することが解かる。このことから、 $p(m_1; m_3) \neq 0$ かつ $p(m_1; m_4)$ であり他は 0 である。ただし、 $p(m_1; m_3) = p(m_3; m_1), p(m_1; m_4) = p(m_4; m_1)$ 。 $p(m_1; m_3), p(m_1; m_4)$ を具体的に求めると、

$$p(m_1; m_3) = \frac{1}{m_4 - m_3} \left\{ \frac{1}{c} - \frac{m_1 + m_4}{2} \right\}$$

$$p(m_1; m_4) = \frac{1}{m_4 - m_3} \left\{ \frac{m_1 + m_3}{2} - \frac{1}{c} \right\} \quad (1-2-5)$$

もし、 $p(m_1; m_3)$ と $p(m_1; m_4)$ が(i) 共に 0 でなければ、粒子配置はランダムに、(ii) どちらかが 0 であれば周期的配置になる。

(1-3) 一般のMまでの場合 この場合の粒子配置は $M=1$ と 2 の場合からほとんど straightforward に与えることができる。ランダム配置は、 $M=2$ と同様にすると $p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m)$ と $p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m')$ から得

られる。このとき、 $p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m)$ の M 個の引き数を巡回置換して得られる全てのものが解である。 $p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m)$ と $p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m')$ を具体的に求めると、

$$\begin{aligned} p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m) &= \frac{1}{m' - m} \left\{ \frac{1}{c} - \frac{m_1 + \dots + m'}{M} \right\} \\ p(m_1; m_2; \dots; m_{M-1}; m') &= \frac{1}{m' - m} \left\{ \frac{m_1 + \dots + m}{M} - \frac{1}{c} \right\} \end{aligned} \quad (1-3-1)$$

$M=2$ の場合と同様に、 $p(m; m; \dots; m; m)$ と $p(m; m; \dots; m; m)$ が (i) 共に 0 でなければ、粒子配置はランダムに、(ii) どちらかが 0 であれば周期的配置になる。

まとめと結語 これまでの結果をまとめると、1次元格子気体模型での多粒子系の基底状態は

有限レンジで (イ) 周期状態、又は (ロ) アモルファス (ランダム) 状態

無限レンジで (ハ) 周期状態、(ニ) 準周期状態、(ホ) アモルファス (ランダム) 状態、(ヘ) ?

(ハ) と (ニ) は相互作用が下に凸であれば容易に現われる³⁾。また、(ホ) はあまり現実的ではないが、相互作用が距離に比例して、減少又は増大するとき現われる。(ヘ) はまだ現われていない状態である。ここではさらに進んで、この (ヘ) の ? を考えてみよう。レンジが有限であれば、粒子配置は2つのクラスターのランダムな分布であった。レンジをどんどん増大してゆくと各クラスターサイズは増大し結果として1粒子当たりの entropy は減少する。レンジ無限大のリミットで entropy=0 である。このとき構造は1意的に決まる。構造が1意的に決まるものに周期状態と準周期状態があった。周期状態と準周期状態の粒子配置の特徴は粒子分布の一樣性である。この性質のため diffraction pattern はシャープであった。適当な相互作用の下で粒子分布の一樣性が破れはしまいか？ このとき diffraction pattern は fuzzy である。この状態があるなら、構造が1意的に決まるが粒子の空間分布はランダムである。この状態を生成する相互作用型についてはこれからの問題である。

文献

- (1) Shinjo K. and Sasada T., J.Phys.C Letter 18(1985)L261
- (2) Shinjo K., Sasada T. and Sugano S., Phys. Rev.B34(1986)391
- (3) Pokrovsky V.L. and Uimin G.V., J.Phys.C 11(1978)3535